

Capítulo 40 Mecânica Quântica

RODRIGO ALVES DIAS

Universidade Federal de Juiz de Fora - UFJF

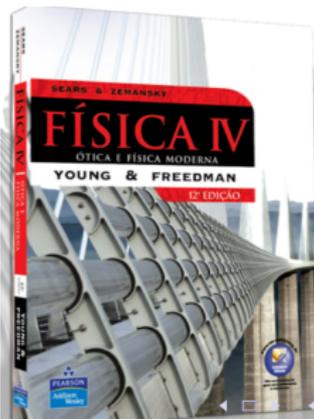
Livro texto: Física 3 - Eletromagnetismo

Autores: Sears e Zemansky

Edição: 12ª

Editora: Pearson - Addison and Wesley

2 de outubro de 2012



Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como calcular as funções de onda e os níveis de energia para uma partícula confinada em uma caixa.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como calcular as funções de onda e os níveis de energia para uma partícula confinada em uma caixa.
- ▶ A forma de analisar o comportamento mecânico-quântico de uma partícula em um poço de potencial.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como calcular as funções de onda e os níveis de energia para uma partícula confinada em uma caixa.
- ▶ A forma de analisar o comportamento mecânico-quântico de uma partícula em um poço de potencial.
- ▶ Como a mecânica quântica torna possível as partículas ir aonde a mecânica newtoniana dizia que elas não poderiam ir.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como calcular as funções de onda e os níveis de energia para uma partícula confinada em uma caixa.
- ▶ A forma de analisar o comportamento mecânico-quântico de uma partícula em um poço de potencial.
- ▶ Como a mecânica quântica torna possível as partículas ir aonde a mecânica newtoniana dizia que elas não poderiam ir.
- ▶ De que maneira usar a mecânica quântica para analisar um oscilador harmônico.

Objetivos de Aprendizagem

Ao estudar este capítulo você aprenderá:

- ▶ Como calcular as funções de onda e os níveis de energia para uma partícula confinada em uma caixa.
- ▶ A forma de analisar o comportamento mecânico-quântico de uma partícula em um poço de potencial.
- ▶ Como a mecânica quântica torna possível as partículas ir aonde a mecânica newtoniana dizia que elas não poderiam ir.
- ▶ De que maneira usar a mecânica quântica para analisar um oscilador harmônico.
- ▶ Como estender os cálculos de mecânica quântica a problemas em três dimensões.

- ▶ O objetivo é aprender como usar a eq. de Schrödinger para determinar os níveis de energia possíveis e as funções de onda correspondentes em vários sistemas.

- ▶ O objetivo é aprender como usar a eq. de Schrödinger para determinar os níveis de energia possíveis e as funções de onda correspondentes em vários sistemas.
- ▶ A eq. de Schrödinger de uma partícula que só se move ao longo do eixo Ox é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- ▶ O objetivo é aprender como usar a eq. de Schrödinger para determinar os níveis de energia possíveis e as funções de onda correspondentes em vários sistemas.
- ▶ A eq. de Schrödinger de uma partícula que só se move ao longo do eixo Ox é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- ▶ O problema fundamental é o seguinte:

- ▶ O objetivo é aprender como usar a eq. de Schrödinger para determinar os níveis de energia possíveis e as funções de onda correspondentes em vários sistemas.
- ▶ A eq. de Schrödinger de uma partícula que só se move ao longo do eixo Ox é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

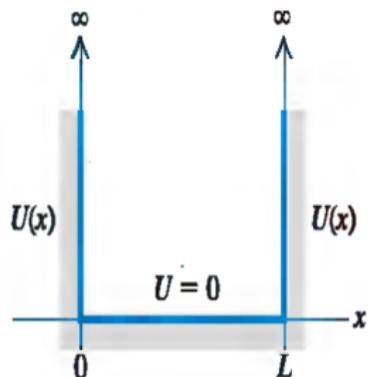
- ▶ O problema fundamental é o seguinte:
- ▶ Para uma dada função energia potencial $V(x)$, quais são as funções de onda de estados estacionários $\psi(x)$ possíveis e quais são as energias correspondentes E ?

└ Partícula em uma Caixa

- ▶ O objetivo é aprender como usar a eq. de Schrödinger para determinar os níveis de energia possíveis e as funções de onda correspondentes em vários sistemas.
- ▶ A eq. de Schrödinger de uma partícula que só se move ao longo do eixo Ox é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- ▶ O problema fundamental é o seguinte:
- ▶ Para uma dada função energia potencial $V(x)$, quais são as funções de onda de estados estacionários $\psi(x)$ possíveis e quais são as energias correspondentes E ?
- ▶ Vamos estudar um sistema que consiste em uma partícula confinada entre duas paredes rígidas separadas por uma distância L .

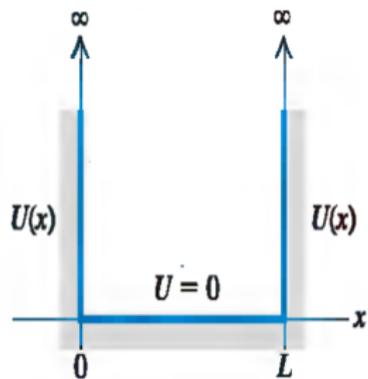


└ Partícula em uma Caixa

- ▶ O objetivo é aprender como usar a eq. de Schrödinger para determinar os níveis de energia possíveis e as funções de onda correspondentes em vários sistemas.
- ▶ A eq. de Schrödinger de uma partícula que só se move ao longo do eixo Ox é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

- ▶ O problema fundamental é o seguinte:
 - ▶ Para uma dada função energia potencial $V(x)$, quais são as funções de onda de estados estacionários $\psi(x)$ possíveis e quais são as energias correspondentes E ?
 - ▶ Vamos estudar um sistema que consiste em uma partícula confinada entre duas paredes rígidas separadas por uma distância L .
- ▶ A $V(x)$ para as paredes rígidas é infinita, e a partícula não pode escapar.
- ▶ Como a partícula está confinada a região $0 \leq x \leq L$, esperamos que $\psi(x) = 0$ fora dessa região.

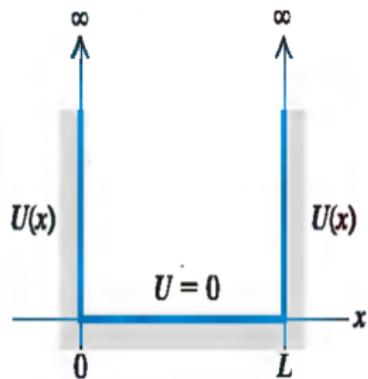


└ Partícula em uma Caixa

- ▶ O objetivo é aprender como usar a eq. de Schrödinger para determinar os níveis de energia possíveis e as funções de onda correspondentes em vários sistemas.
- ▶ A eq. de Schrödinger de uma partícula que só se move ao longo do eixo Ox é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

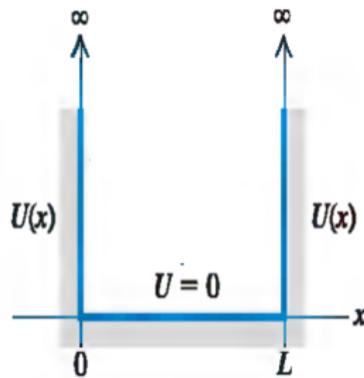
- ▶ O problema fundamental é o seguinte:
 - ▶ Para uma dada função energia potencial $V(x)$, quais são as funções de onda de estados estacionários $\psi(x)$ possíveis e quais são as energias correspondentes E ?
 - ▶ Vamos estudar um sistema que consiste em uma partícula confinada entre duas paredes rígidas separadas por uma distância L .
- ▶ A $V(x)$ para as paredes rígidas é infinita, e a partícula não pode escapar.
- ▶ Como a partícula está confinada a região $0 \leq x \leq L$, esperamos que $\psi(x) = 0$ fora dessa região.
- ▶ Se $V(x)\psi(x)$ deve ser finito, então $\psi(x) = 0$ para $V(x) = \infty$.
- ▶ Se $\psi(x)$ deve ser uma função contínua, assim, $\psi(x) = 0$ nas fronteiras da região $x = 0$ e $x = L$. (Condições de contorno)



└ Partícula em uma Caixa

- ▶ A $V(x)$ para as paredes rígidas é infinita, e a partícula não pode escapar.
- ▶ Como a partícula está confinada a região $0 \leq x \leq L$, esperamos que $\psi(x) = 0$ fora dessa região.
- ▶ Se $V(x)\psi(x)$ deve ser finito, então $\psi(x) = 0$ para $V(x) = \infty$.
- ▶ Se $\psi(x)$ deve ser uma função contínua, assim, $\psi(x) = 0$ nas fronteiras da região $x = 0$ e $x = L$. (Condições de contorno)
- ▶ Para região no interior da caixa $0 < x < L$ temos que $V(x) = 0$ e assim,

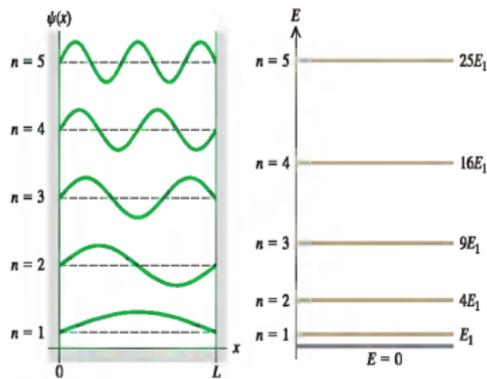
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x)$$



└ Partícula em uma Caixa

- ▶ A $V(x)$ para as paredes rígidas é infinita, e a partícula não pode escapar.
- ▶ Como a partícula está confinada a região $0 \leq x \leq L$, esperamos que $\psi(x) = 0$ fora dessa região.
- ▶ Se $V(x)\psi(x)$ deve ser finito, então $\psi(x) = 0$ para $V(x) = \infty$.
- ▶ Se $\psi(x)$ deve ser uma função contínua, assim, $\psi(x) = 0$ nas fronteiras da região $x = 0$ e $x = L$. (Condições de contorno)
- ▶ Para região no interior da caixa $0 < x < L$ temos que $V(x) = 0$ e assim,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x)$$



$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x)$$

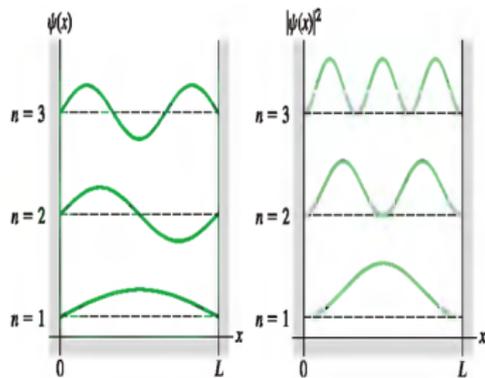
$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}$$

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) e^{-iE_n t / \hbar}$$

└ Partícula em uma Caixa

- ▶ A $V(x)$ para as paredes rígidas é infinita, e a partícula não pode escapar.
- ▶ Como a partícula está confinada a região $0 \leq x \leq L$, esperamos que $\psi(x) = 0$ fora dessa região.
- ▶ Se $V(x)\psi(x)$ deve ser finito, então $\psi(x) = 0$ para $V(x) = \infty$.
- ▶ Se $\psi(x)$ deve ser uma função contínua, assim, $\psi(x) = 0$ nas fronteiras da região $x = 0$ e $x = L$. (Condições de contorno)
- ▶ Para região no interior da caixa $0 < x < L$ temos que $V(x) = 0$ e assim,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x)$$



$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x)$$

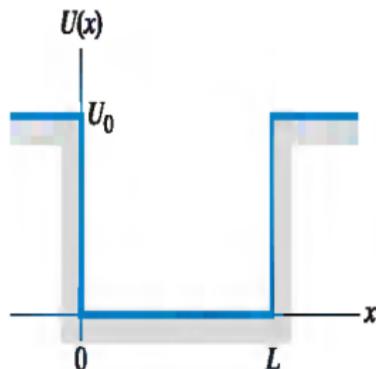
$$E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = n^2 \frac{h^2}{8mL^2}$$

$$\psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) e^{-iE_n t / \hbar}$$

- ▶ Um poço de potencial e uma função energia potencial $U(x)$ que possui um mínimo.

- ▶ Um poço de potencial e uma função energia potencial $U(x)$ que possui um mínimo.
- ▶ O **poço de potencial quadrado** é uma função $U(x)$ tal que:

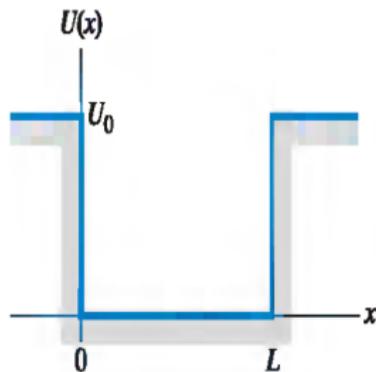
$$\begin{aligned}V(x) &= 0 \quad \text{se } 0 \leq x \leq L \\ &= U_0 \quad \text{se } x < 0 \text{ ou } x > L\end{aligned}$$



- ▶ Um poço de potencial e uma função energia potencial $U(x)$ que possui um mínimo.
- ▶ O **poço de potencial quadrado** é uma função $U(x)$ tal que:

$$\begin{aligned}U(x) &= 0 \quad \text{se } 0 \leq x \leq L \\ &= U_0 \quad \text{se } x < 0 \text{ ou } x > L\end{aligned}$$

- ▶ Modelo simples de um elétron confinado em uma placa metálica de espessura L , se movendo \perp à superfície da placa.

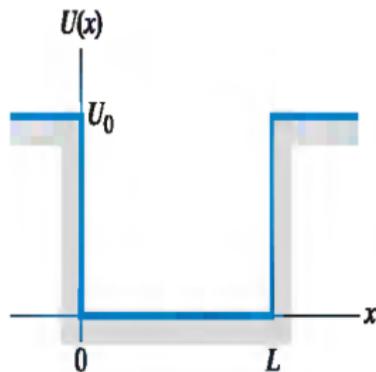


└ Poço de Potencial

- ▶ Um poço de potencial e uma função energia potencial $U(x)$ que possui um mínimo.
- ▶ O **poço de potencial quadrado** é uma função $U(x)$ tal que:

$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \quad \text{se } 0 \leq x \leq L \\ &= U_0 \quad \text{se } x < 0 \text{ ou } x > L \end{aligned}$$

- ▶ Modelo simples de um elétron confinado em uma placa metálica de espessura L , se movendo \perp à superfície da placa.
- ▶ O elétron pode se mover livremente no interior do metal, mas terá de escalar a altura V_0 para escapar do metal.

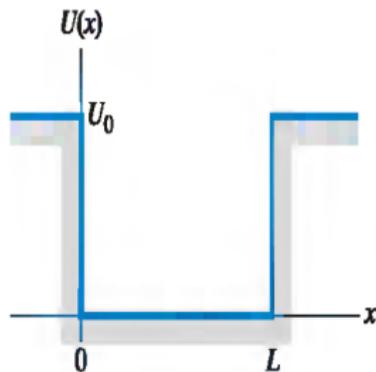


└ Poço de Potencial

- ▶ Um poço de potencial e uma função energia potencial $U(x)$ que possui um mínimo.
- ▶ O **poço de potencial quadrado** é uma função $U(x)$ tal que:

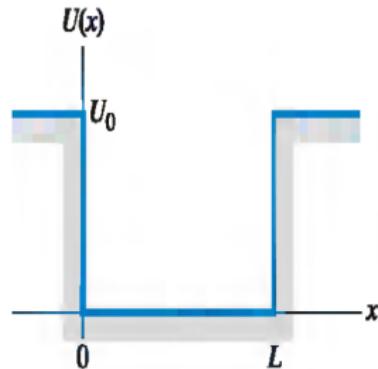
$$\begin{aligned} V(x) &= 0 \quad \text{se } 0 \leq x \leq L \\ &= U_0 \quad \text{se } x < 0 \text{ ou } x > L \end{aligned}$$

- ▶ Modelo simples de um elétron confinado em uma placa metálica de espessura L , se movendo \perp à superfície da placa.
- ▶ O elétron pode se mover livremente no interior do metal, mas terá de escalar a altura V_0 para escapar do metal.
- ▶ A energia V_0 é relacionada com a função trabalho.



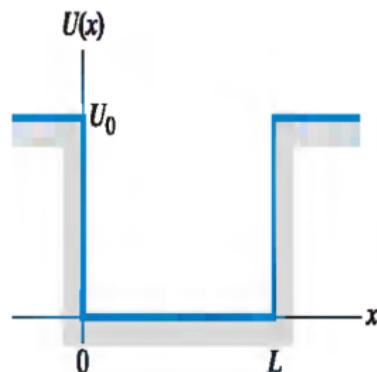
Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ Se $E < U_0$ falamos que o estado é localizado e o chamamos de **estado ligado**.



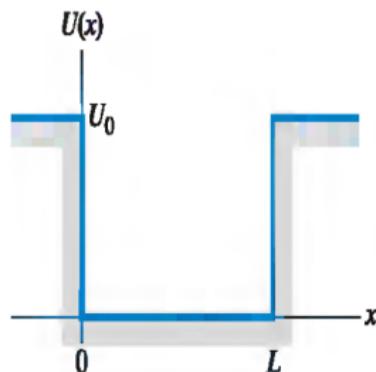
Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ Se $E < U_0$ falamos que o estado é localizado e o chamamos de **estado ligado**.
- ▶ Todos os estados são ligados quando o poço de potencial possui profundidade infinita.



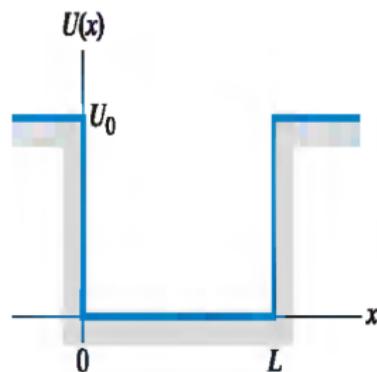
Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ Se $E < U_0$ falamos que o estado é localizado e o chamamos de **estado ligado**.
- ▶ Todos os estados são ligados quando o poço de potencial possui profundidade infinita.
- ▶ Quando $E > U_0$ a partícula **não** está ligada.



Estados ligados de um poço de potencial quadrado

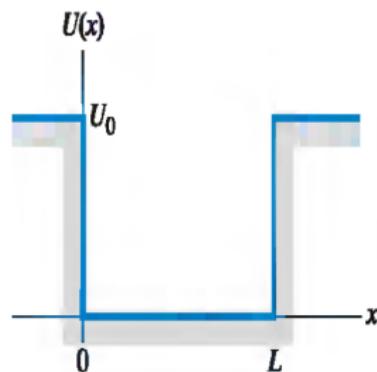
- ▶ As soluções da eq. de Schrödinger para $E < U_0$ na:



Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ As soluções da eq. de Schrödinger para $E < U_0$ na:
 $E < U_0$ na:
- ▶ região $0 \leq x \leq L$ será:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x)$$



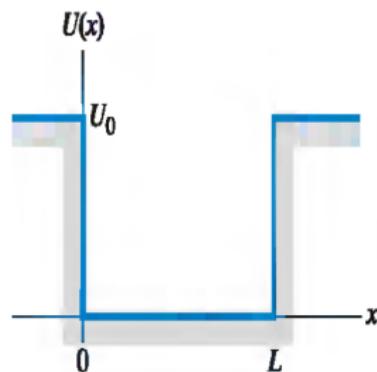
Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ As soluções da eq. de Schrödinger para $E < U_0$ na:
 $E < U_0$ na:
- ▶ região $0 \leq x \leq L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\psi(x) = A \cos(k_1 x) + B \sin(k_1 x)$$



Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ As soluções da eq. de Schrödinger para $E < U_0$ na:
- ▶ região $0 \leq x \leq L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\psi(x) = A \cos(k_1 x) + B \sin(k_1 x)$$

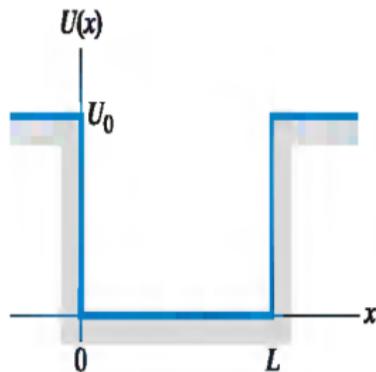
- ▶ região $x < 0$ ou $x > L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$$

$$\psi(x) = Ce^{-k_2 x} + De^{+k_2 x} \quad \text{se } x < 0$$

$$\psi(x) = Ee^{-k_2 x} + Fe^{+k_2 x} \quad \text{se } x > L$$



Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ As soluções da eq. de Schrödinger para $E < U_0$ na:

- ▶ região $0 \leq x \leq L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\psi(x) = A \cos(k_1 x) + B \sin(k_1 x)$$

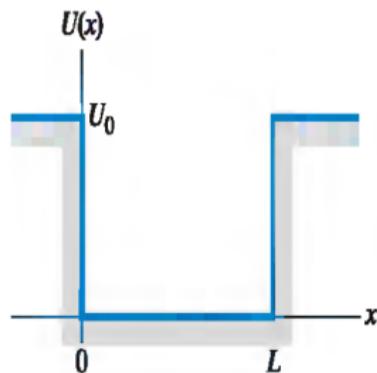
- ▶ região $x < 0$ ou $x > L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$$

$$\psi(x) = Ce^{-k_2 x} + De^{+k_2 x} \quad \text{se } x < 0$$

$$\psi(x) = Ee^{-k_2 x} + Fe^{+k_2 x} \quad \text{se } x > L$$



- ▶ Como ψ deve ser finita, para $x \rightarrow \pm\infty$ então: $C = F = 0$

Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ As soluções da eq. de Schrödinger para $E < U_0$ na:
- ▶ região $0 \leq x \leq L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\psi(x) = A \cos(k_1 x) + B \sin(k_1 x)$$

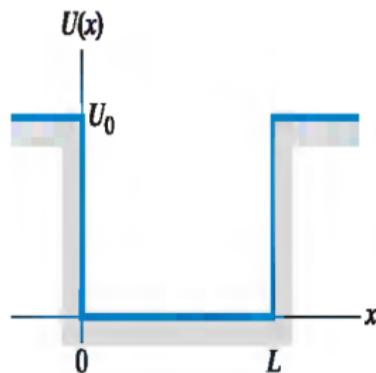
- ▶ região $x < 0$ ou $x > L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$$

$$\psi(x) = D e^{+k_2 x} \quad \text{se } x < 0$$

$$\psi(x) = E e^{-k_2 x} \quad \text{se } x > L$$



- ▶ Como ψ deve ser finita, para $x \rightarrow \pm\infty$ então: $C = F = 0$
- ▶ Impondo as condições de contorno, que $\psi(x)$ e $\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$ devem ser contínuas nas fronteiras $x = 0$ e $x = L$ obtemos,

Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ As soluções da eq. de Schrödinger para $E < U_0$ na:
- ▶ região $0 \leq x \leq L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\psi(x) = A \cos(k_1 x) + B \sin(k_1 x)$$

- ▶ região $x < 0$ ou $x > L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$$

$$\psi(x) = D e^{+k_2 x} \quad \text{se } x < 0$$

$$\psi(x) = E e^{-k_2 x} \quad \text{se } x > L$$

- ▶ Como ψ deve ser finita, para $x \rightarrow \pm\infty$ então: $C = F = 0$
- ▶ Impondo as condições de contorno, que $\psi(x)$ e $\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$ devem ser contínuas nas fronteiras $x = 0$ e $x = L$ obtemos,

$$A = D$$

$$B k_1 = D k_2$$

$$A \cos(k_1 L) + B \sin(k_1 L) = G e^{-k_2 L}$$

$$k_1 [A \sin(k_1 L) - B \cos(k_1 L)] = G k_2 e^{-k_2 L}$$

Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ As soluções da eq. de Schrödinger para $E < U_0$ na:
- ▶ região $0 \leq x \leq L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x)$$

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\psi(x) = A \cos(k_1 x) + B \sin(k_1 x)$$

- ▶ região $x < 0$ ou $x > L$ será:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi(x)$$

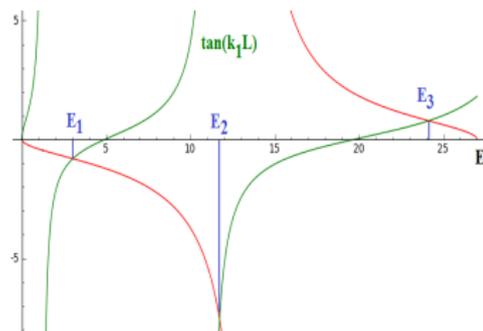
$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$$

$$\psi(x) = D e^{+k_2 x} \quad \text{se } x < 0$$

$$\psi(x) = E e^{-k_2 x} \quad \text{se } x > L$$

- ▶ Como ψ deve ser finita, para $x \rightarrow \pm\infty$ então: $C = F = 0$
- ▶ Impondo as condições de contorno, que $\psi(x)$ e $\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$ devem ser contínuas nas fronteiras $x = 0$ e $x = L$ obtemos,

$$\tan(k_1 L) = \frac{2}{\left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1}\right)}$$



Estados ligados de um poço de potencial quadrado

- ▶ As soluções da eq. de Schrödinger para $E < U_0$ na:
 $E < U_0$ na:
- ▶ região $0 \leq x \leq L$ será:

$$k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar$$

$$\psi(x) = A \cos(k_1 x) + B \sin(k_1 x)$$

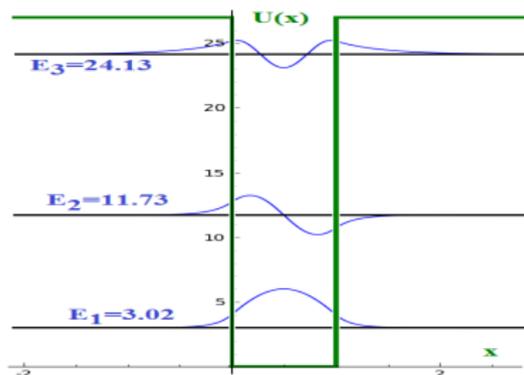
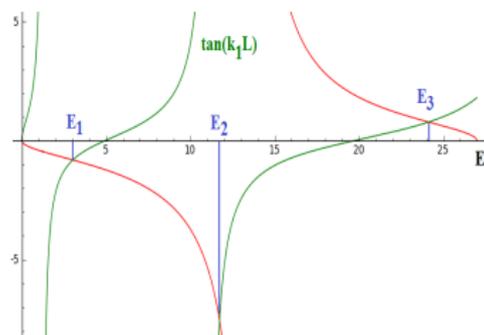
- ▶ região $x < 0$ ou $x > L$ será:

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$$

$$\psi(x) = D e^{+k_2 x} \text{ se } x < 0$$

$$\psi(x) = E e^{-k_2 x} \text{ se } x > L$$

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{k_2 x} & x < 0 \\ A[\cos(k_1 x) + \frac{k_1}{k_2} \sin(k_1 x)] & 0 \leq x \leq L \\ A[\cos(k_1 L) + \frac{k_1}{k_2} \sin(k_1 L)] e^{-k_2(x-L)} & x > L \end{cases}$$

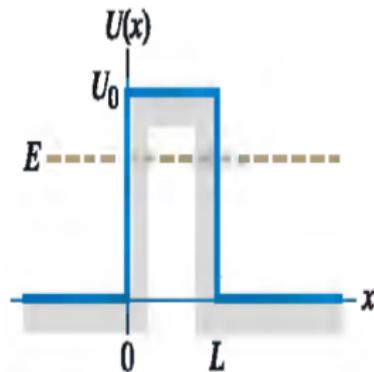


- ▶ Uma barreira de potencial é o oposto do poço de potencial, é descrita por um máximo na energia potencial.

└ Barreira de Potencial e Tunelamento

- ▶ Uma barreira de potencial é o oposto do poço de potencial, é descrita por um máximo na energia potencial.
- ▶ A **barreira de potencial quadrada** é uma função $U(x)$ tal que:

$$\begin{aligned}U(x) &= U_0 \quad \text{se } 0 \leq x \leq L \\ &= 0 \quad \text{se } x < 0 \text{ ou } x > L\end{aligned}$$

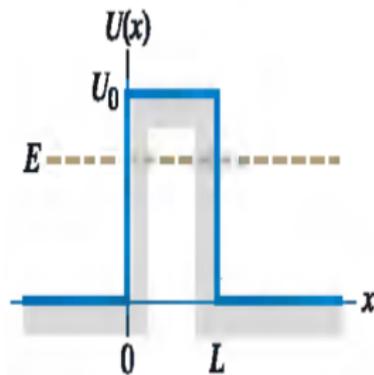


└ Barreira de Potencial e Tunelamento

- ▶ Uma barreira de potencial é o oposto do poço de potencial, é descrita por um máximo na energia potencial.
- ▶ A **barreira de potencial quadrada** é uma função $U(x)$ tal que:

$$\begin{aligned}U(x) &= U_0 \text{ se } 0 \leq x \leq L \\ &= 0 \text{ se } x < 0 \text{ ou } x > L\end{aligned}$$

- ▶ Uma partícula que encontra uma barreira não necessariamente retorna.

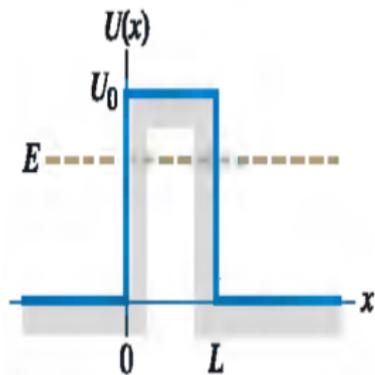


└ Barreira de Potencial e Tunelamento

- ▶ Uma barreira de potencial é o oposto do poço de potencial, é descrita por um máximo na energia potencial.
- ▶ A **barreira de potencial quadrada** é uma função $U(x)$ tal que:

$$\begin{aligned}U(x) &= U_0 \text{ se } 0 \leq x \leq L \\ &= 0 \text{ se } x < 0 \text{ ou } x > L\end{aligned}$$

- ▶ Uma partícula que encontra uma barreira não necessariamente retorna.
- ▶ Existe alguma probabilidade de que ela passe para o outro lado da barreira.

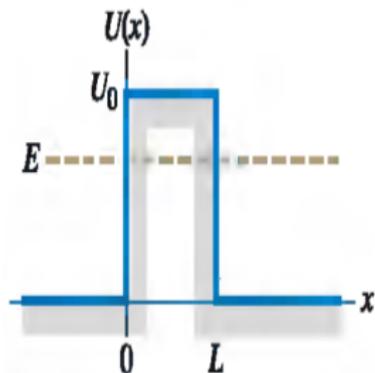


└ Barreira de Potencial e Tunelamento

- ▶ Uma barreira de potencial é o oposto do poço de potencial, é descrita por um máximo na energia potencial.
- ▶ A **barreira de potencial quadrada** é uma função $U(x)$ tal que:

$$\begin{aligned}U(x) &= U_0 \text{ se } 0 \leq x \leq L \\ &= 0 \text{ se } x < 0 \text{ ou } x > L\end{aligned}$$

- ▶ Uma partícula que encontra uma barreira não necessariamente retorna.
- ▶ Existe alguma probabilidade de que ela passe para o outro lado da barreira.
- ▶ A penetração de uma barreira é chamada de **tunelamento**.

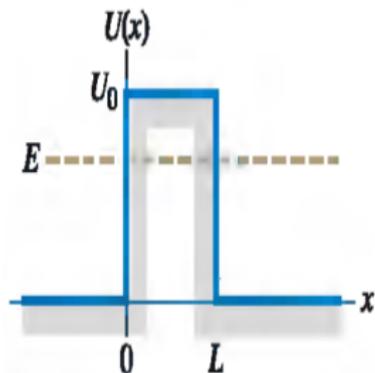


└ Barreira de Potencial e Tunelamento

- ▶ Uma barreira de potencial é o oposto do poço de potencial, é descrita por um máximo na energia potencial.
- ▶ A **barreira de potencial quadrada** é uma função $U(x)$ tal que:

$$\begin{aligned}U(x) &= U_0 \text{ se } 0 \leq x \leq L \\ &= 0 \text{ se } x < 0 \text{ ou } x > L\end{aligned}$$

- ▶ Uma partícula que encontra uma barreira não necessariamente retorna.
- ▶ Existe alguma probabilidade de que ela passe para o outro lado da barreira.
- ▶ A penetração de uma barreira é chamada de **tunelamento**.
- ▶ Esse modelo pode representar um elétron entre 2 placas metálicas separadas por ar.

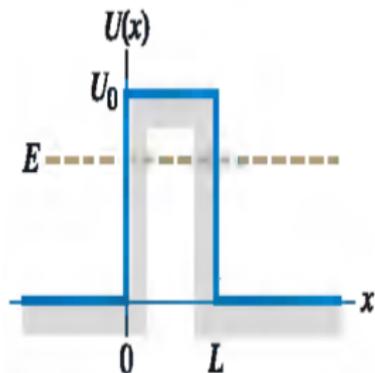


└ Barreira de Potencial e Tunelamento

- ▶ Uma barreira de potencial é o oposto do poço de potencial, é descrita por um máximo na energia potencial.
- ▶ A **barreira de potencial quadrada** é uma função $U(x)$ tal que:

$$\begin{aligned} U(x) &= U_0 \quad \text{se } 0 \leq x \leq L \\ &= 0 \quad \text{se } x < 0 \text{ ou } x > L \end{aligned}$$

- ▶ Uma partícula que encontra uma barreira não necessariamente retorna.
- ▶ Existe alguma probabilidade de que ela passe para o outro lado da barreira.
- ▶ A penetração de uma barreira é chamada de **tunelamento**.
- ▶ Esse modelo pode representar um elétron entre 2 placas metálicas separadas por ar.
- ▶ As soluções para $E < U_0$ são:

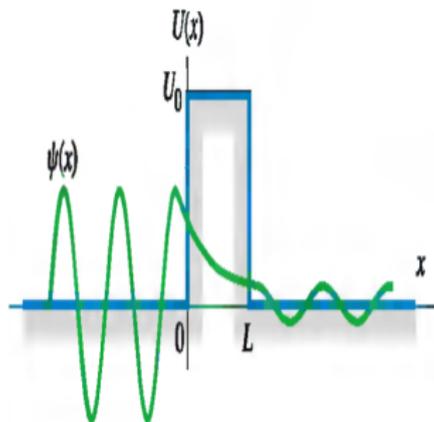


└ Barreira de Potencial e Tunelamento

- ▶ Uma barreira de potencial é o oposto do poço de potencial, é descrita por um máximo na energia potencial.
- ▶ A **barreira de potencial quadrada** é uma função $U(x)$ tal que:

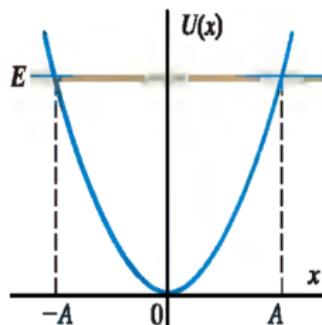
$$\begin{aligned}
 U(x) &= U_0 \quad \text{se } 0 \leq x \leq L \\
 &= 0 \quad \text{se } x < 0 \text{ ou } x > L
 \end{aligned}$$

- ▶ Uma partícula que encontra uma barreira não necessariamente retorna.
- ▶ Existe alguma probabilidade de que ela passe para o outro lado da barreira.
- ▶ A penetração de uma barreira é chamada de **tunelamento**.
- ▶ Esse modelo pode representar um elétron entre 2 placas metálicas separadas por ar.
- ▶ As soluções para $E < U_0$ são:

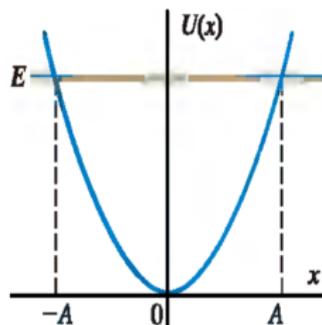


- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.

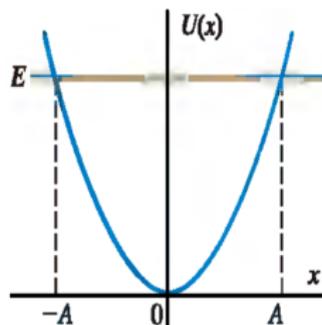
- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.



- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.

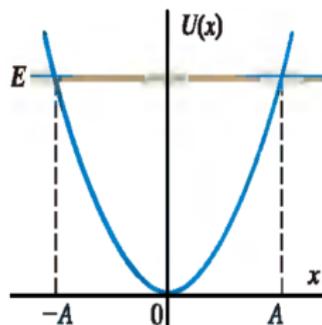


- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ A energia de um fóton é dado por: $E = \hbar\omega$.



- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ A energia de um fóton é dado por: $E = \hbar\omega$.
- ▶ Uma hipótese razoável é que os E_n sejam,

$$E_n = n\hbar\omega = n\hbar\sqrt{\frac{C_x}{m}}$$



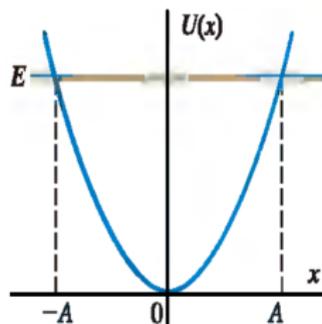
↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ A energia de um fóton é dado por: $E = \hbar\omega$.
- ▶ Uma hipótese razoável é que os E_n sejam,

$$E_n = n\hbar\omega = n\hbar\sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ Esses níveis de energia foram os usados por Planck na dedução de sua lei da radiação.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\sqrt{\frac{C_x}{m}}$$



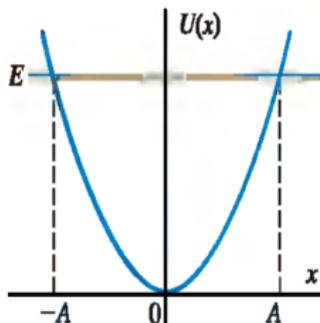
↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$



└ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

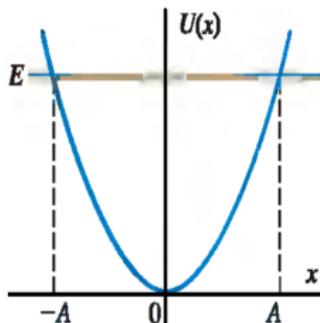
- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha}x$ obtemos:



↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

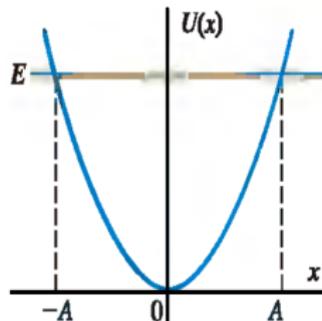
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha}x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$



↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

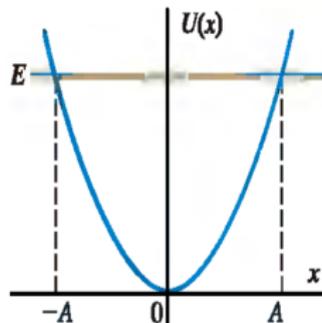
$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar} \right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Devemos achar soluções que ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial u}$ sejam unívocas, contínuas e finitas, para $u \rightarrow \pm \infty$.



↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Devemos achar soluções que ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial u}$ sejam unívocas, contínuas e finitas, para $u \rightarrow \pm\infty$.
- ▶ As duas primeiras condições serão automaticamente satisfeitas pelas soluções que encontraremos.

↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Devemos achar soluções que ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial u}$ sejam unívocas, contínuas e finitas, para $u \rightarrow \pm \infty$.
- ▶ As duas primeiras condições serão automaticamente satisfeitas pelas soluções que encontraremos.
- ▶ Será necessário considerar explicitamente que $\psi(u) \rightarrow 0$ se $|u| \rightarrow \infty$.

↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Devemos achar soluções que ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial u}$ sejam unívocas, contínuas e finitas, para $u \rightarrow \pm \infty$.
- ▶ As duas primeiras condições serão automaticamente satisfeitas pelas soluções que encontraremos.
- ▶ Será necessário considerar explicitamente que $\psi(u) \rightarrow 0$ se $|u| \rightarrow \infty$.
- ▶ Para um valor finito de E , $\frac{\beta}{\alpha} \ll u^2$ para valores grandes de $|u|$.

↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Devemos achar soluções que ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial u}$ sejam unívocas, contínuas e finitas, para $u \rightarrow \pm \infty$.
- ▶ As duas primeiras condições serão automaticamente satisfeitas pelas soluções que encontraremos.
- ▶ Será necessário considerar explicitamente que $\psi(u) \rightarrow 0$ se $|u| \rightarrow \infty$.
- ▶ Para um valor finito de E , $\frac{\beta}{\alpha} \ll u^2$ para valores grandes de $|u|$.

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} = u^2 \psi(u) \quad |u| \rightarrow \infty$$

↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Devemos achar soluções que ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial u}$ sejam unívocas, contínuas e finitas, para $u \rightarrow \pm \infty$.
- ▶ As duas primeiras condições serão automaticamente satisfeitas pelas soluções que encontraremos.
- ▶ Será necessário considerar explicitamente que $\psi(u) \rightarrow 0$ se $|u| \rightarrow \infty$.
- ▶ Para um valor finito de E , $\frac{\beta}{\alpha} \ll u^2$ para valores grandes de $|u|$.

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} = u^2 \psi(u) \quad |u| \rightarrow \infty$$

$$\psi(u) = A e^{-u^2/2} \quad |u| \rightarrow \infty$$

↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$\psi(u) = A e^{-u^2/2} H(u)$$

↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$\psi(u) = A e^{-u^2/2} H(u)$$

$$\frac{d^2 H(u)}{du^2} - 2u \frac{dH(u)}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1 \right) H(u) = 0$$

↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$\psi(u) = A e^{-u^2/2} H(u)$$

$$\frac{d^2 H(u)}{du^2} - 2u \frac{dH(u)}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1\right) H(u) = 0$$

$$H(u) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n$$

↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar} \right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$\psi(u) = A e^{-u^2/2} H(u)$$

$$\frac{d^2 H(u)}{du^2} - 2u \frac{dH(u)}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1 \right) H(u) = 0$$

$$H(u) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n$$

$$\frac{\beta}{\alpha} = 2n + 1 = \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{\hbar}{\omega m}$$

O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$\psi(u) = A e^{-u^2/2} H(u)$$

$$\frac{d^2 H(u)}{du^2} - 2u \frac{dH(u)}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha} - 1 \right) H(u) = 0$$

$$H(u) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n u^n$$

$$\frac{\beta}{\alpha} = 2n + 1 = \frac{2mE}{\hbar^2} \frac{\hbar}{\omega m}$$

$$\frac{2E}{\hbar \omega} = 2n + 1$$

↳ O Oscilador Harmônico

- ▶ Um oscilador harmônico é uma partícula de massa m que sofre uma força $F_x = -C_x X$.
- ▶ A energia potencial é: $U(x) = \frac{C_x}{2} X^2$.
- ▶ Se m é deslocada do equilíbrio, oscilará com $X(t) = A \cos(\omega t + \delta)$, $\omega = \sqrt{\frac{C_x}{m}}$.
- ▶ Veremos que os níveis de energia corretos são:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \sqrt{\frac{C_x}{m}}$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para o oscilador harmônico é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \frac{C_x}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar}\right)^2 x^2 \right] \psi(x) = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + [\beta - \alpha^2 x^2] \psi(x) = 0$$

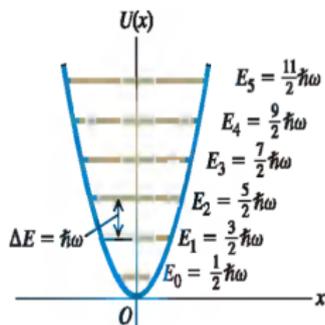
- ▶ $\beta = \frac{2mE}{\hbar^2}$, $\alpha = \frac{\omega m}{\hbar}$ e definindo $u = \sqrt{\alpha} x$ obtemos:

$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- ▶ Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$\psi(u) = A e^{-u^2/2} H(u)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$



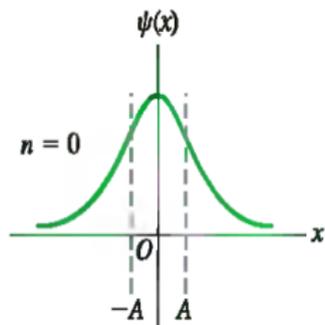
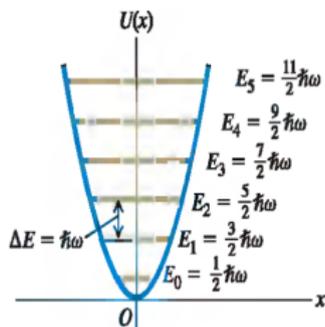
$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

$$\psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u)$$

$$H_n(u) = \frac{(-1)^n}{2} e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$



$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

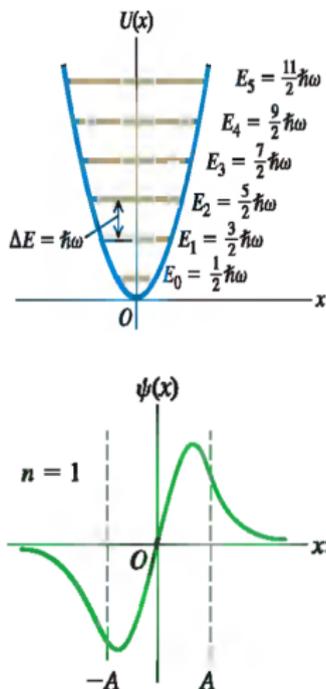
► Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

$$\psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u)$$

$$H_n(u) = \frac{(-1)^n}{2} e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$

$$\psi_0(u) = A_0 e^{-u^2/2} (1)$$



$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

► Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

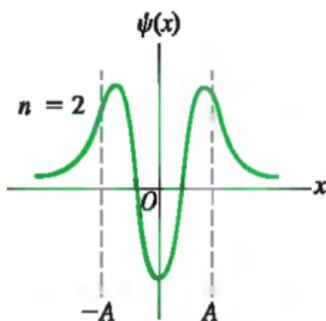
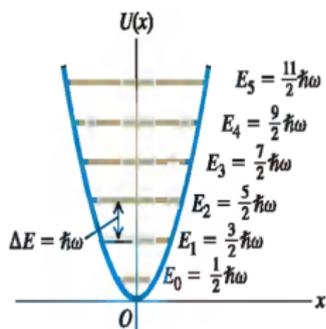
$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

$$\psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u)$$

$$H_n(u) = \frac{(-1)^n}{2} e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$

$$\psi_0(u) = A_0 e^{-u^2/2} (1)$$

$$\psi_1(u) = A_1 e^{-u^2/2} (u)$$



$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

► Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

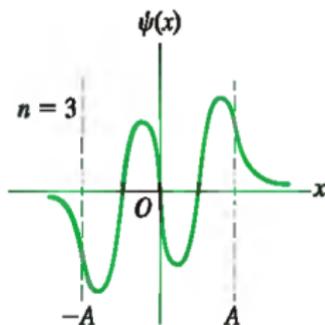
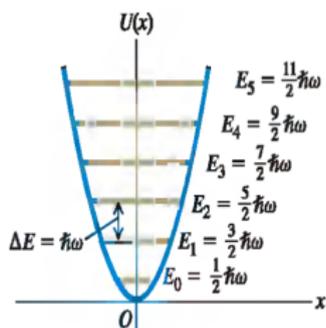
$$\psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u)$$

$$H_n(u) = \frac{(-1)^n}{2} e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$

$$\psi_0(u) = A_0 e^{-u^2/2} (1)$$

$$\psi_1(u) = A_1 e^{-u^2/2} (u)$$

$$\psi_2(u) = A_2 e^{-u^2/2} (1 - 2u^2)$$



$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

$$\psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u)$$

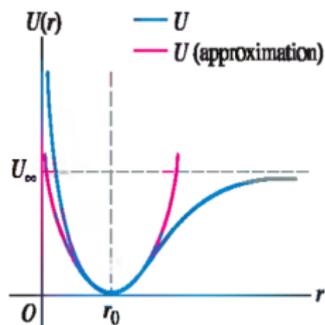
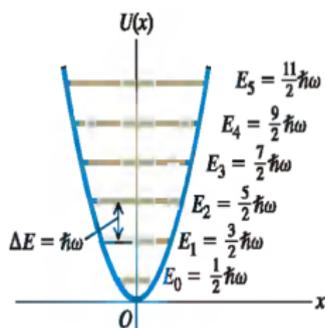
$$H_n(u) = \frac{(-1)^n}{2} e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$

$$\psi_0(u) = A_0 e^{-u^2/2} (1)$$

$$\psi_1(u) = A_1 e^{-u^2/2} (u)$$

$$\psi_2(u) = A_2 e^{-u^2/2} (1 - 2u^2)$$

$$\psi_3(u) = A_3 e^{-u^2/2} (3u - 2u^3)$$



$$\frac{\partial^2 \psi(u)}{\partial u^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha} - u^2 \right] \psi(u) = 0$$

- Isso sugere que a solução da eq. completa seja,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

$$\psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u)$$

$$H_n(u) = \frac{(-1)^n}{2} e^{u^2} \frac{d^n}{du^n} e^{-u^2}$$

$$\psi_0(u) = A_0 e^{-u^2/2} (1)$$

$$\psi_1(u) = A_1 e^{-u^2/2} (u)$$

$$\psi_2(u) = A_2 e^{-u^2/2} (1 - 2u^2)$$

$$\psi_3(u) = A_3 e^{-u^2/2} (3u - 2u^3)$$

- A eq. de Schrödinger indep. do tempo para uma partícula em 3D é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + U(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para uma partícula em 3D é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + U(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ Em estruturas atômicas é comum a função energia potencial ser esfericamente simétrica, $U = U(r)$.

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para uma partícula em 3D é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + U(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ Em estruturas atômicas é comum a função energia potencial ser esfericamente simétrica, $U = U(r)$.
- ▶ Depende somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ a partir da origem das coordenadas.

- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para uma partícula em 3D é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + U(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ Em estruturas atômicas é comum a função energia potencial ser esfericamente simétrica, $U = U(r)$.
- ▶ Depende somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ a partir da origem das coordenadas.
- ▶ Usamos dessa simetria, utilizando coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) .

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial \phi^2}$$

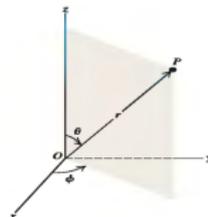
- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para uma partícula em 3D é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + U(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ Em estruturas atômicas é comum a função energia potencial ser esfericamente simétrica, $U = U(r)$.
- ▶ Depende somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ a partir da origem das coordenadas.
- ▶ Usamos dessa simetria, utilizando coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) .

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial \phi^2}$$



- ▶ A eq. de Schrödinger indep. do tempo para uma partícula em 3D é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,y,z) + U(x,y,z)\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z)$$

- ▶ Em estruturas atômicas é comum a função energia potencial ser esfericamente simétrica, $U = U(r)$.
- ▶ Depende somente de $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ a partir da origem das coordenadas.
- ▶ Usamos dessa simetria, utilizando coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) .

$$\nabla^2\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}$$

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial \phi^2}$$

- ▶ Para o átomo de Hidrogênio,

$$U(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$$

